

Simulación de plantas Parte II

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Mapa curricular de la materia

Simulación

Optimización



```
graph TD; A[Simulación] --> B[Optimización]
```

Mapa curricular de la materia

Simulación



Optimización

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

Mapa curricular de físico-química

1. Flash isotérmico
2. Punto de burbuja
3. Punto de rocío
4. Síntesis de procesos
5. Simuladores comerciales
6. Margen de error

Definiciones

Modelado

- Planta: Conjunto de sectores
- Sector: Conjunto de equipos

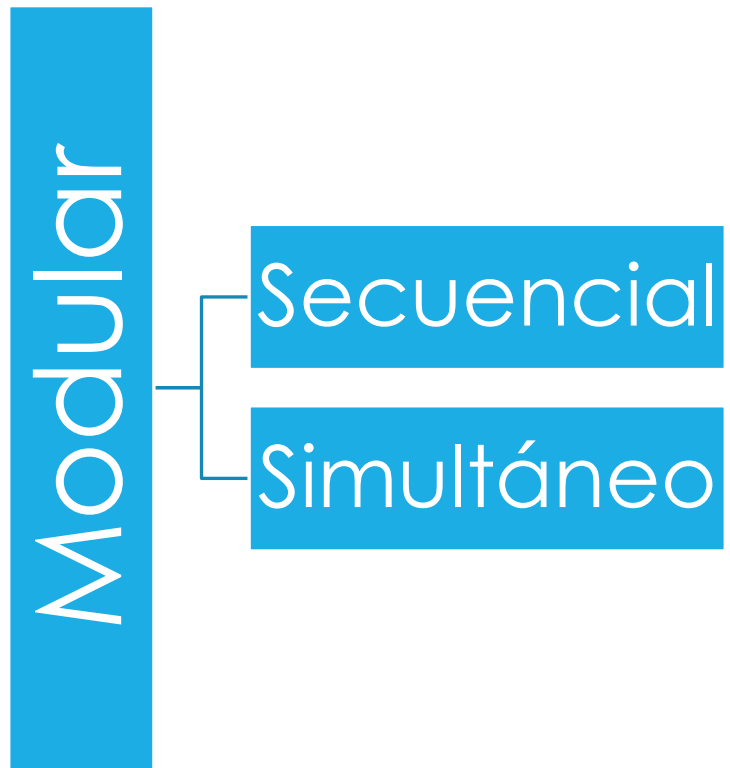


Enfoques de simulación de plantas

- Global u orientado a ecuaciones
- Modular



Enfoque modular

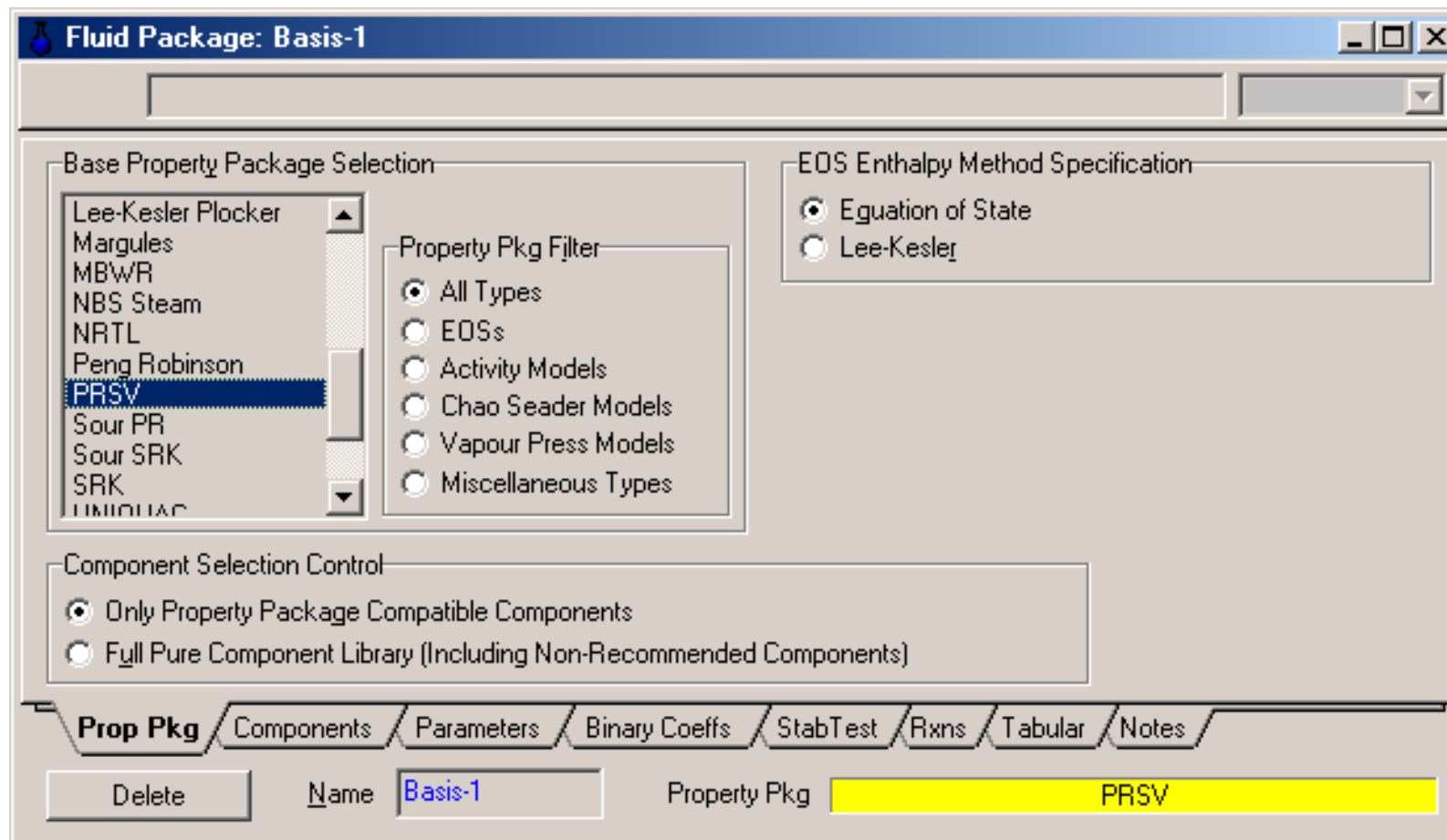


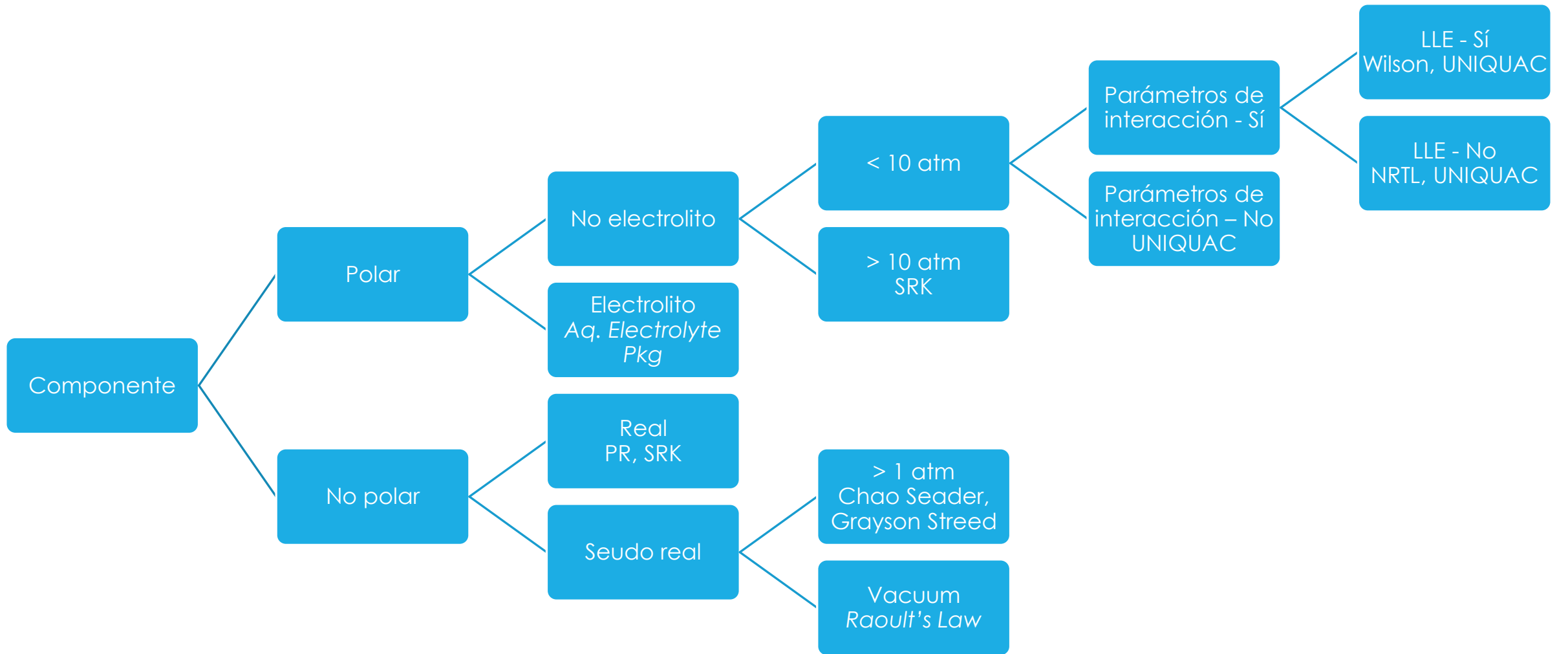
Simuladores de planta

Estructura del simulador



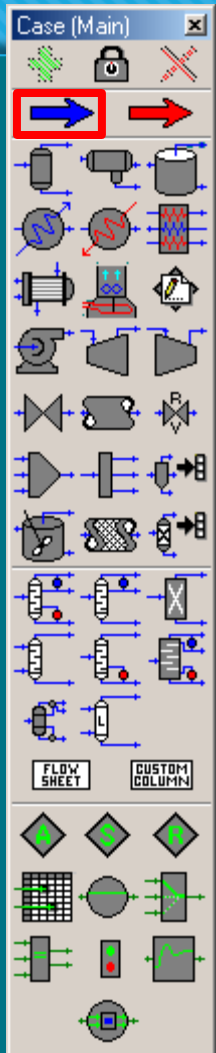
Modelos físicos-químicos





Flash isotérmico

Corriente material



Corriente material

- Composición
- Flujo
- Presión
- Temperatura
- → Cálculo flash isotérmico

Material Stream: 1

Worksheet	Stream Name	LIQUID
Conditions	Vapour / Phase Fraction	<empty>
Properties	Temperature [C]	<empty>
Composition	Pressure [kPa]	<empty>
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	<empty>
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	<empty>
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	<empty>
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	<empty>
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	<empty>
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	<empty>
Normalized Yield	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty>
	Fluid Package	Basis-1
	Utility Type	

Worksheet Attachments Dynamics

Unknown Compositions

Delete Define from Other Stream..

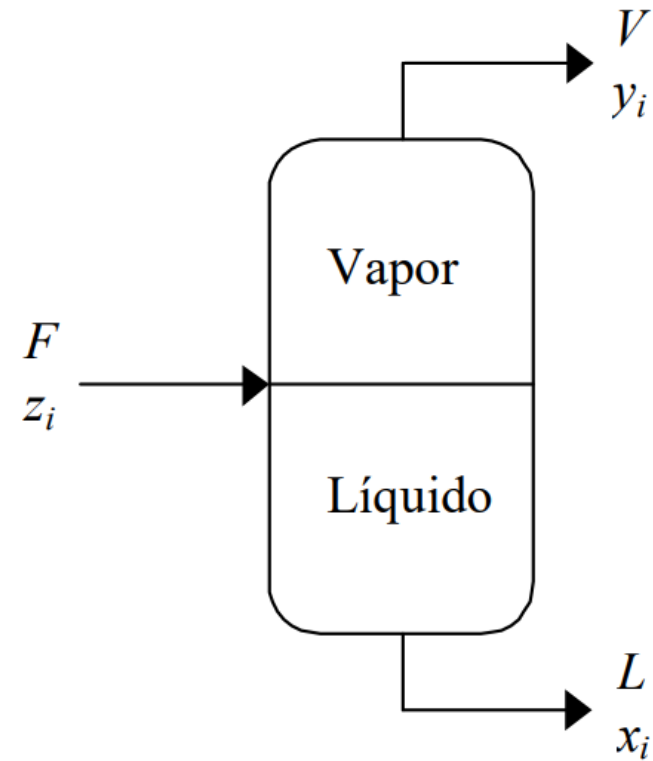
Cálculo flash

- BM: $F = L + V$
- BC: $z_i F = x_i L + y_i V$
- Equilibrio: $y_i = K_i x_i$
- Fracción vapor: $\theta = \frac{V}{F}$
- $\sum_i x_i = 1, \sum_i y_i = 1$
- Incógnitas: x_i, y_i, L, V, θ

[Video de cálculo flash](#)

[MATLAB](#)

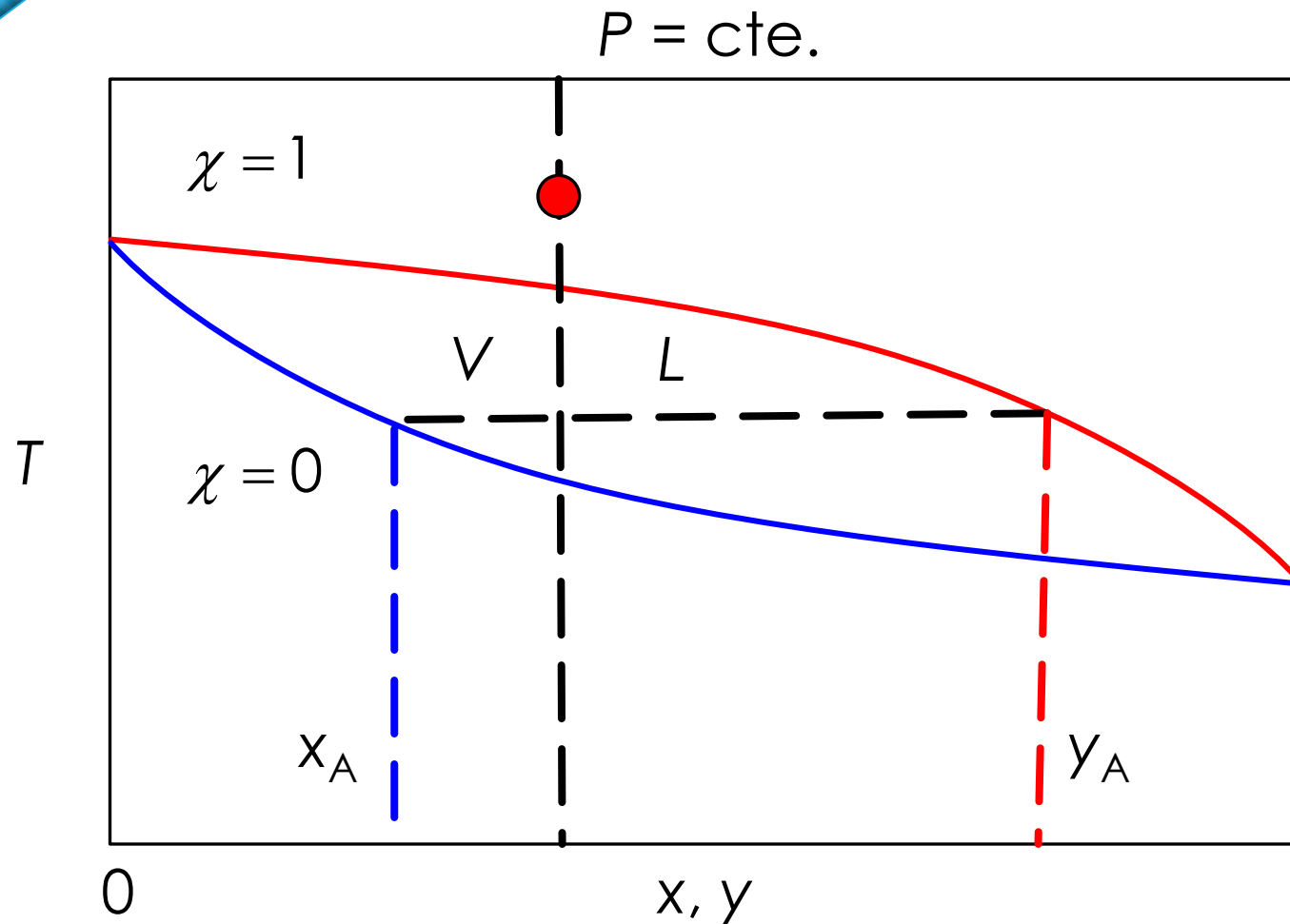
[Apunte de flash](#)



Bubble point y dew point

- Punto de burbuja: *Bubble point*
- Punto de rocío: *Dew point*
- Mezcla binaria, A y B.
- El componente más volátil es A.
- x : Fracción molar en el líquido de A.
- y : Fracción molar en el vapor de A.
- $\chi = \frac{m_V}{m_V + m_L}$: Título de vapor, fracción másica de vapor.

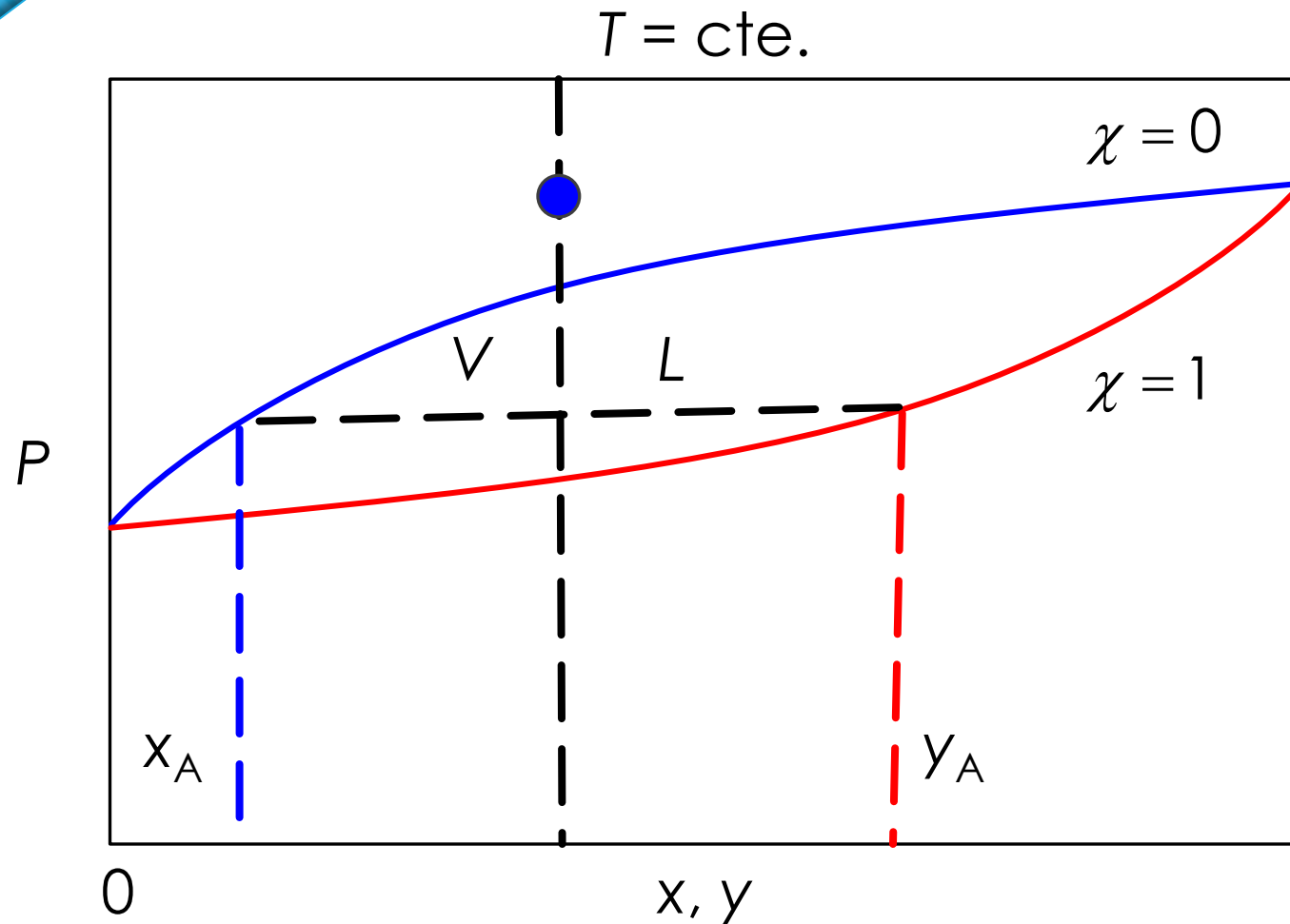
Bubble point y dew point



$$\chi = \frac{m_V}{m_V + m_L}$$

- Curva de burbuja
- Curva de rocío

Bubble point y dew point



$$\chi = \frac{m_V}{m_V + m_L}$$

- Curva de burbuja
- Curva de rocío

Cálculo de flash

Título como resultado

- Datos: x, P, T
 - Resultado: χ
 - Si $\chi = 0$, líquido.
 - Si $\chi = 1$, vapor.
 - Si $0 < \chi < 1$, líquido y vapor.

Título como dato

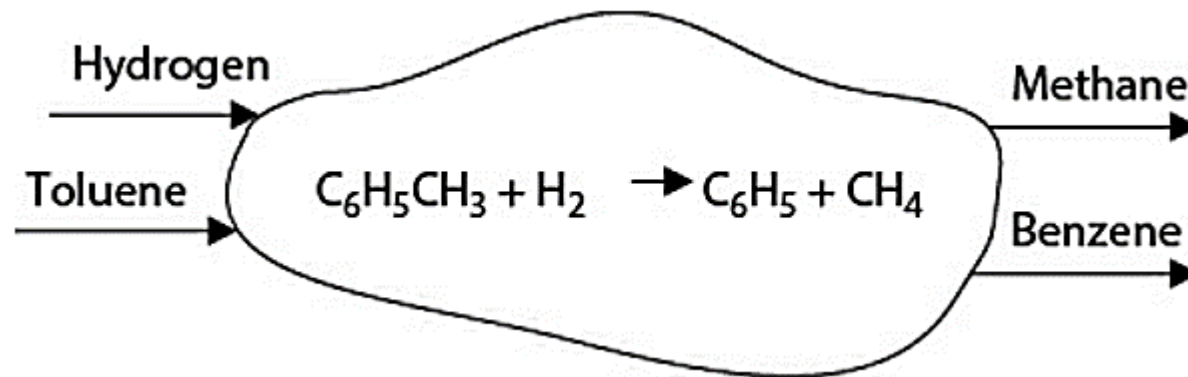
- Datos: x, P, χ
 - Resultado: T
 - Si $\chi = 0$, T bubble point.
 - Si $\chi = 1$, T dew point.
- Datos: x, T, χ
 - Resultado: P
 - Si $\chi = 0$, P bubble point.
 - Si $\chi = 1$, P dew point.

Síntesis de procesos

Síntesis de procesos

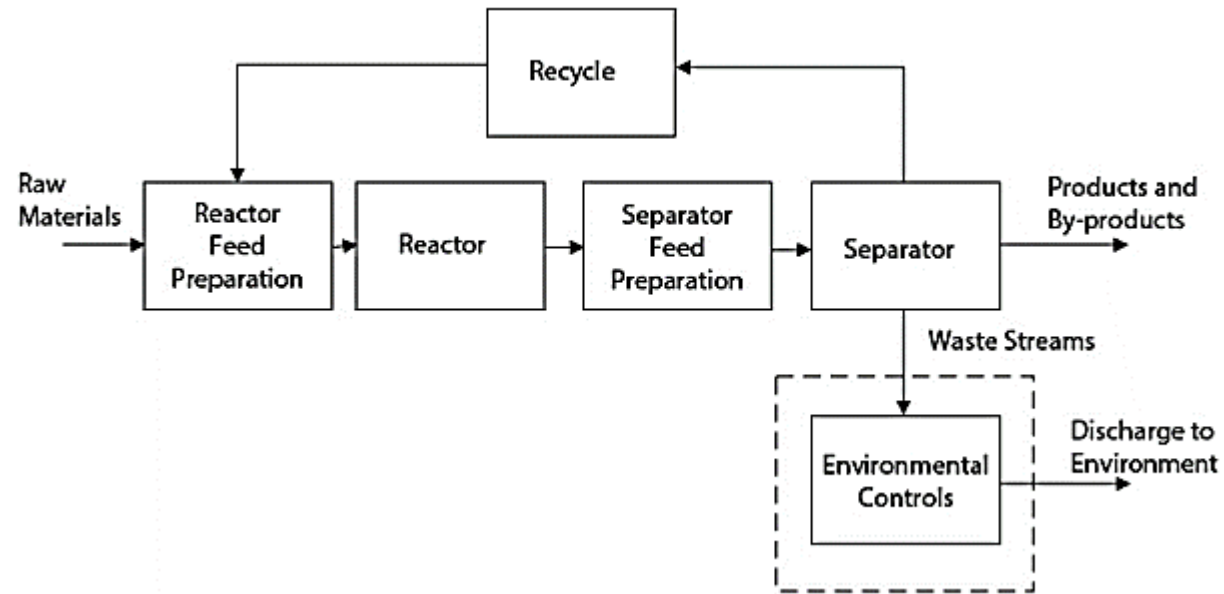


Hidrodessalquilación de tolueno



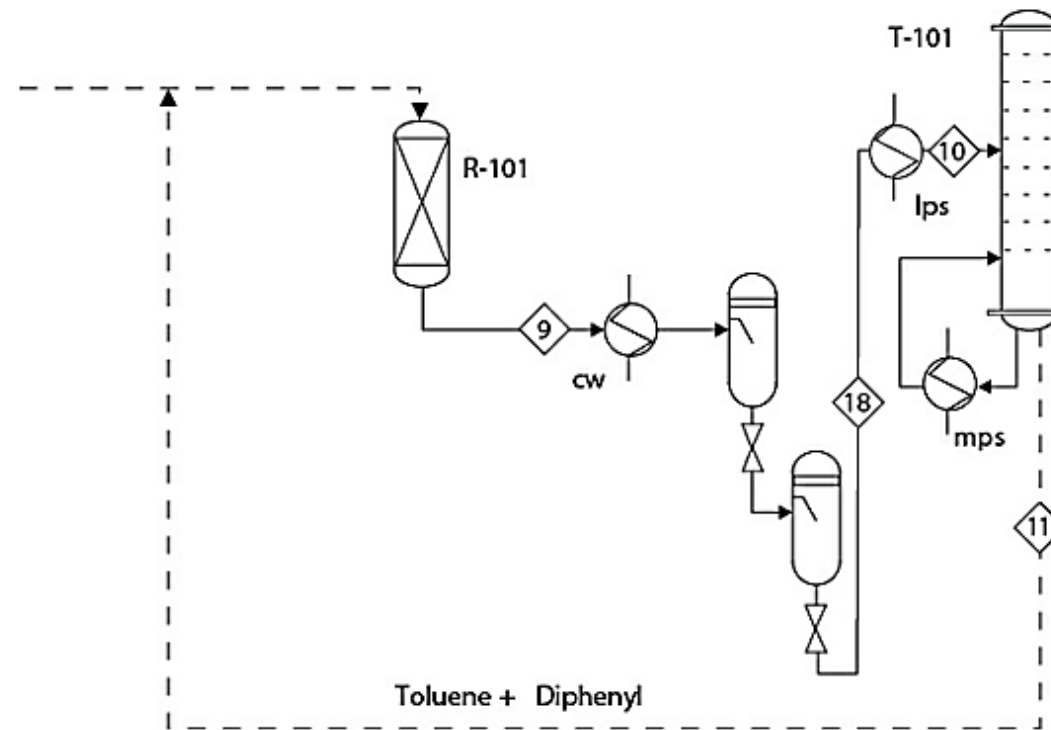
Estructura de entrada-salida

Hidrodessalquilación de tolueno



Block Flow Process diagram (BFD)

Hidrodessalquilación de tolueno



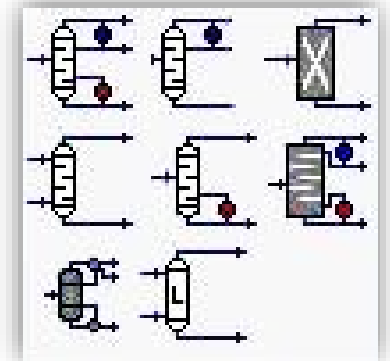
Process Flow diagram (PFD)

Niveles de modelado

The screenshot displays the Aspen HYSYS V7.2 software interface. The main window shows a process flow diagram with a green background. Two streams are highlighted: '2-Recycle' and '3-Purge'. A 'Material Stream: 3-Purge' properties window is open, showing the following data:

Worksheet	Stream Name	3-Purge
Conditions	Vapour / Phase Fraction	1.0000
Properties	Temperature [C]	400.0
Properties	Pressure [kPa]	1000
Composition	Molar Flow [kgmole/h]	2.841
Composition	Mass Flow [kg/h]	25.00
User Variables	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	8.619e-02
Notes	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	1.094e+02
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	138.25.12
Notes	Heat Flow [kJ/h]	3.109e+02
Notes	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty>
Cost Parameters	Fluid Package	Basis-1
Cost Parameters	Utility Type	

The 'Material Stream: 3-Purge' window also includes a 'Worksheet' tab and buttons for 'Delete' and 'Define from Other Stream...'. The main interface shows a toolbar with various icons for simulation and flow sheet manipulation. The status bar at the bottom indicates 'PFD 1'.

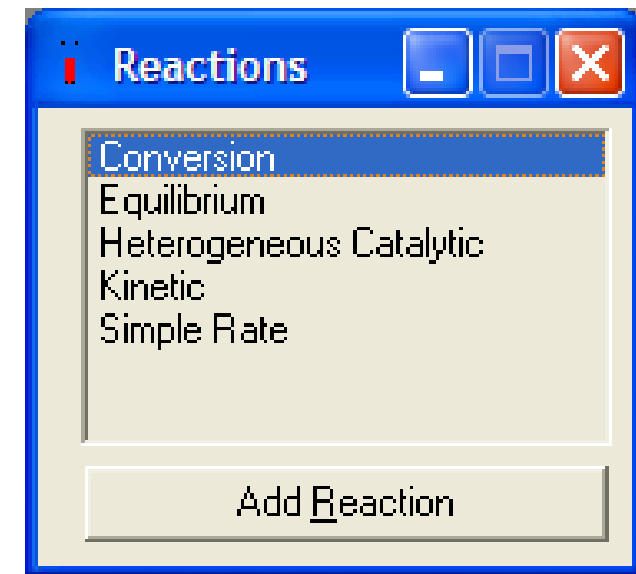


Reacciones

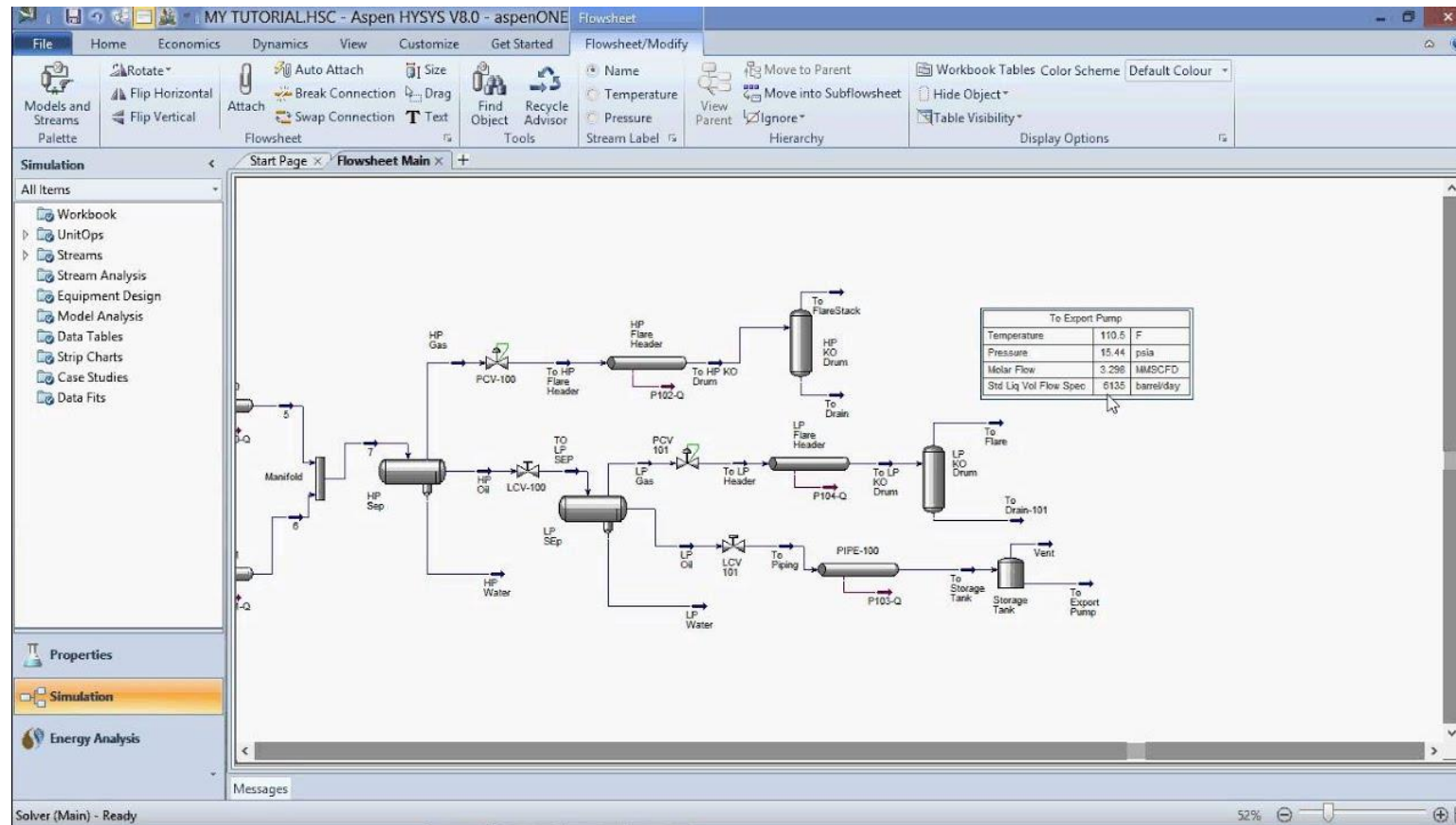
- De conversión;
- De equilibrio;
- Cinéticas;
- Cinéticas-equilibrio reverso.

$$r = k_d C_A - k_i C_B$$

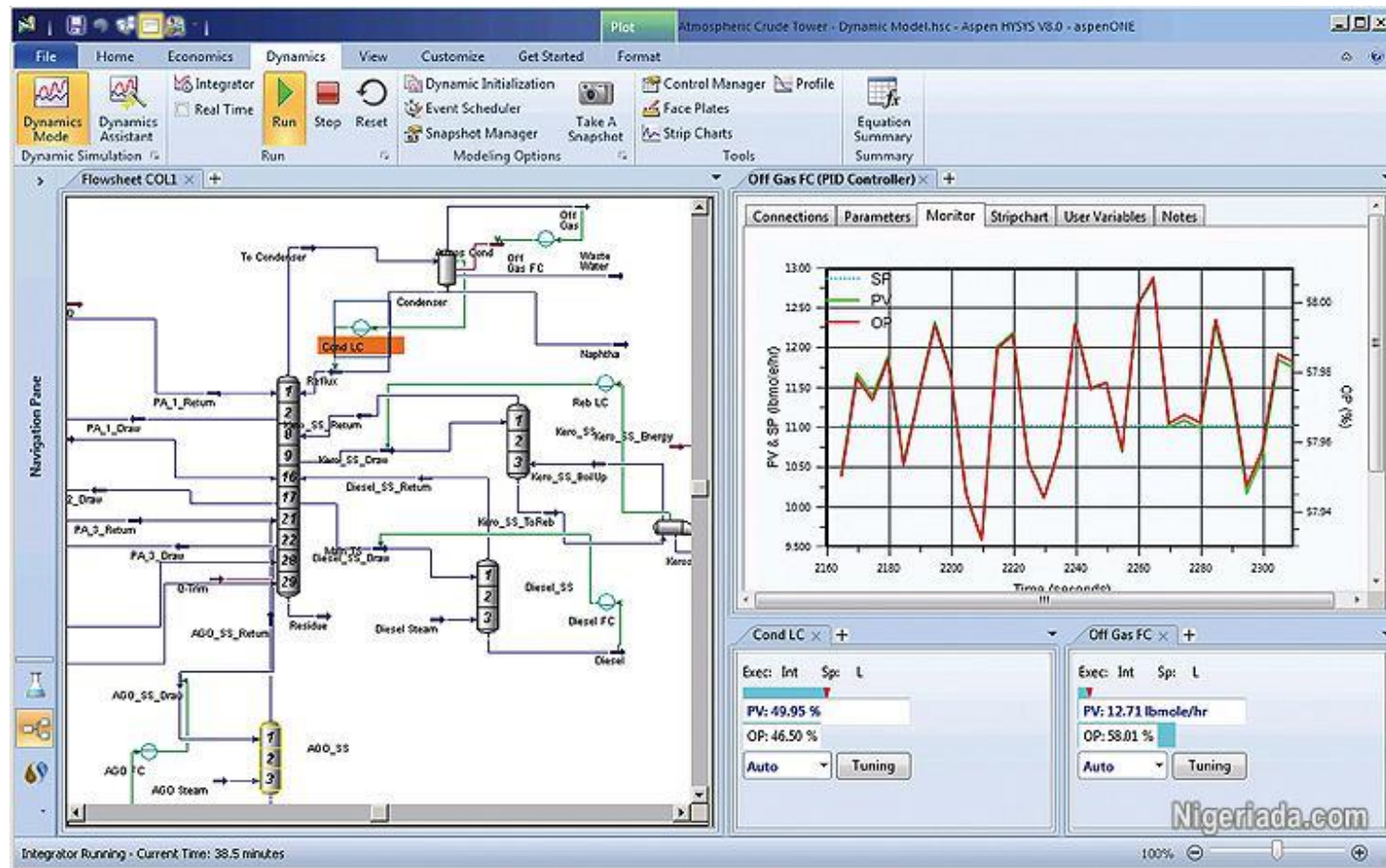
$$k = \frac{k_d}{k_i}$$



Simulación estacionaria

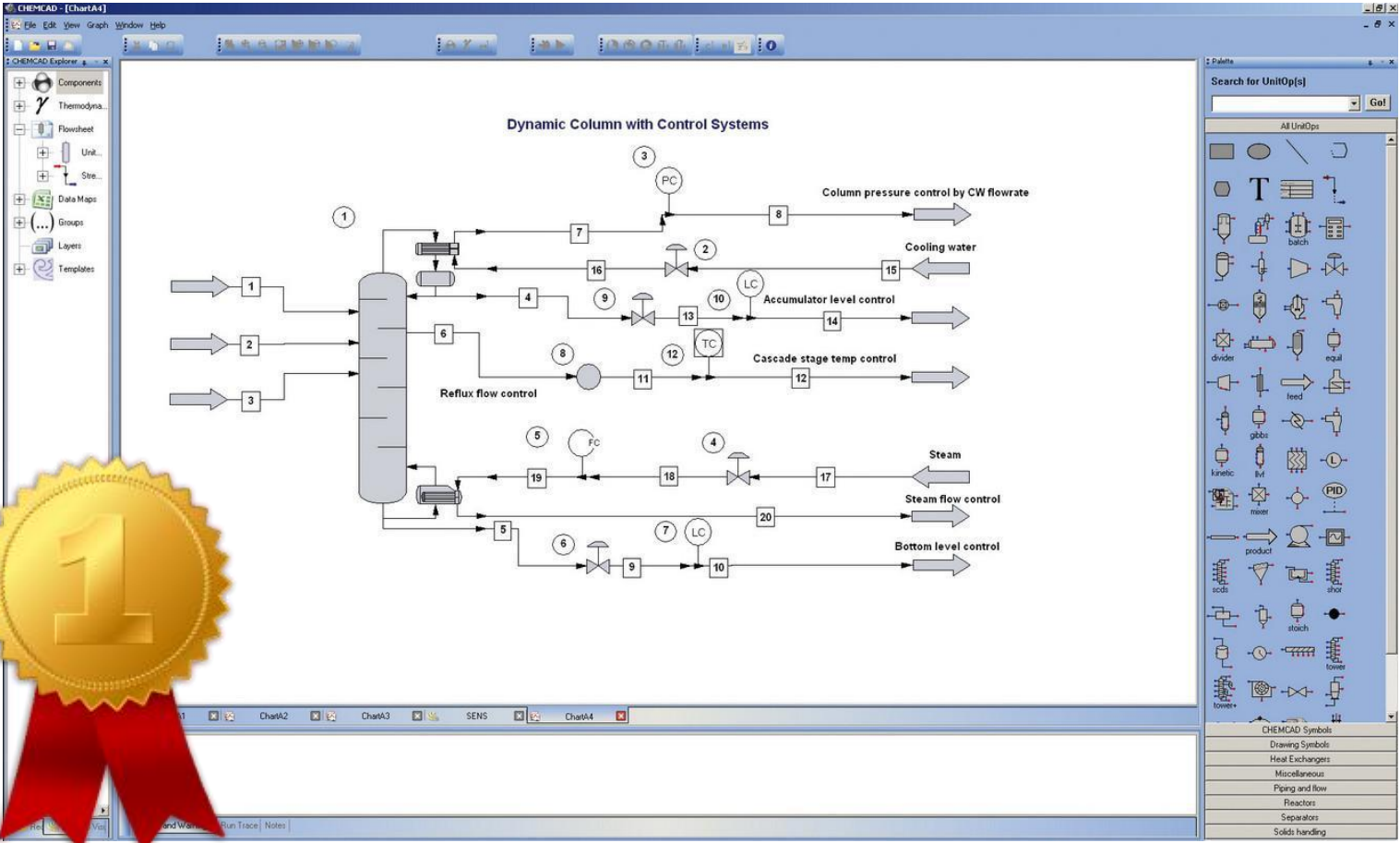


Simulación dinámica



Simuladores comerciales

Chemcad



Aspen plus

The screenshot displays the Aspen Plus V10 software interface for a process simulation. The main window shows a detailed flowsheet with various unit operations and streams. The interface includes a menu bar, a toolbar, and several panels for simulation control and results viewing.

Simulation Parameters:

- Capital: ___USD
- Utilities: ___USD/Year
- Energy Savings: ___MW (___%)
- Exchangers - Unknown: 0 OK: 0 Risk: 0

Flowsheet Components:

- Streams:** LIQOUT (MATERIAL) - Results, BENZENE (MATERIAL), RECYBENZ (MATERIAL), RECYBENZ (MATERIAL) - Results, R-100 (RPlug), Results Summary - Streams.
- Unit Operations:** P-100, P-101, P-102, MX-100, V-100, HX-1, HX-2, REACIN, REACOUT, SALES GAS, C-100, GAS, LIQOUT, V-101, D-101, D-100, D-101BTM, D-100BTM, RECYCLE, RECYBENZ.
- Streams Data:** Q=69628, Q=46643, Q=44831, Q=-1254, Q=962, QC=37736, QR=38279, QC=-27534, QR=35422.

Model Palette:

- Mixers/Splitters: Mixer
- Separators: FSplit, SSplit
- Exchangers
- Columns
- Reactors
- Pressure Changers
- Manipulators
- Solids
- Solids Separators
- Batch Models
- User Mode

Properties Panel:

- Temperature (C)
- Q Duty (MW)
- W Power (MW)

Simulation Status: Results Available, Check Status

System Tray: 6:16 PM, 10/4/2019

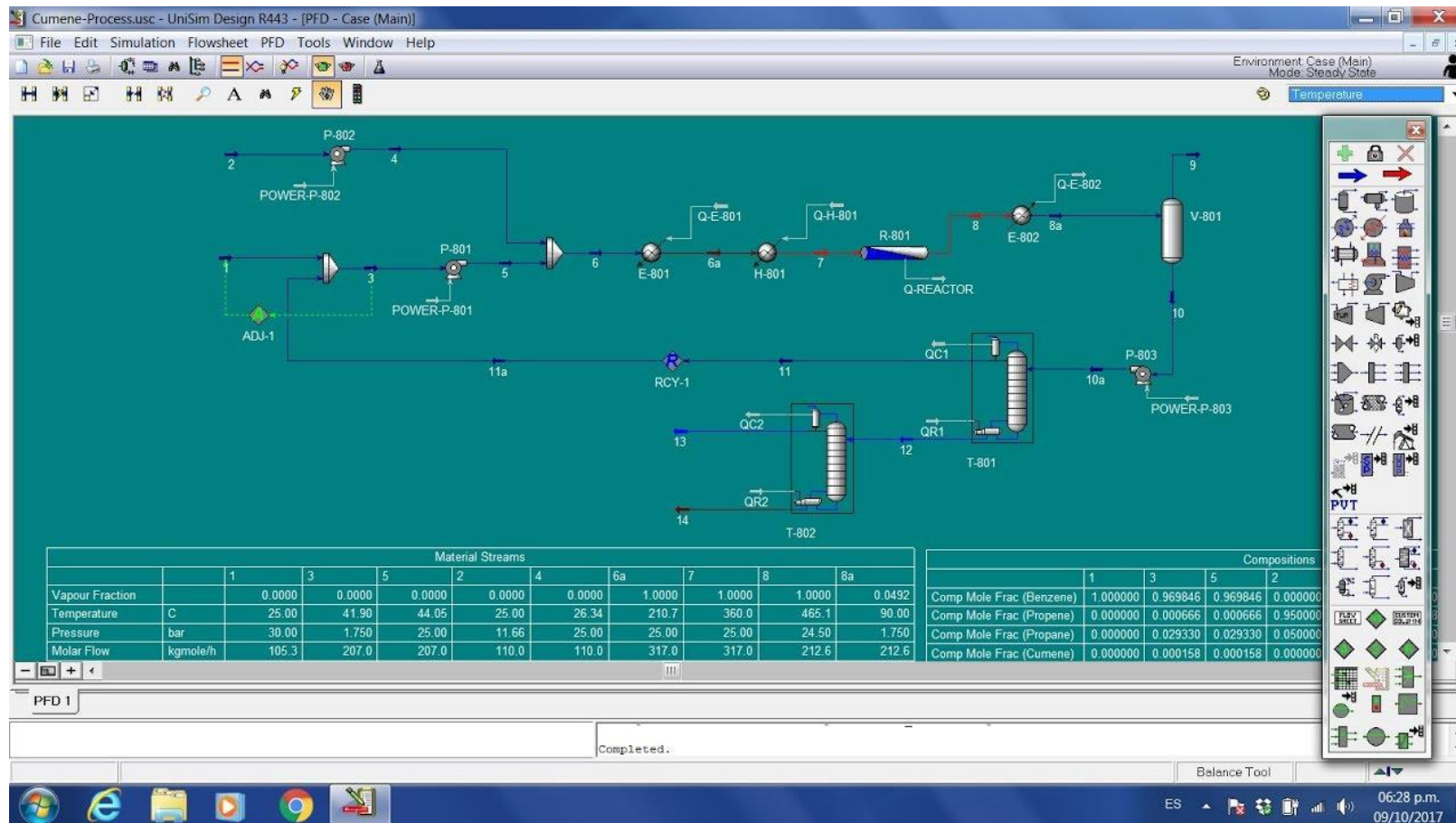
Aspen HYSYS

The screenshot displays the Aspen HYSYS V9 software interface for a process simulation. The main window shows a process flowsheet for Ammonia Synthesis, featuring several process units including mixers (MIX-102, MIX-100, MIX-101), reactors (PFR-100, PFR-101, PFR-102), exchangers (E-104, E-102), and valves (VLV-100, VLV-101, VLV-102). The interface includes a ribbon menu with tabs for File, Home, Economics, Dynamics, View, Customize, Resources, Flowsheet/Modify, and Format. A 'Palette' window is open on the right, showing various process unit icons. The status bar at the bottom indicates the time as 21:02 on 31/07/2016.

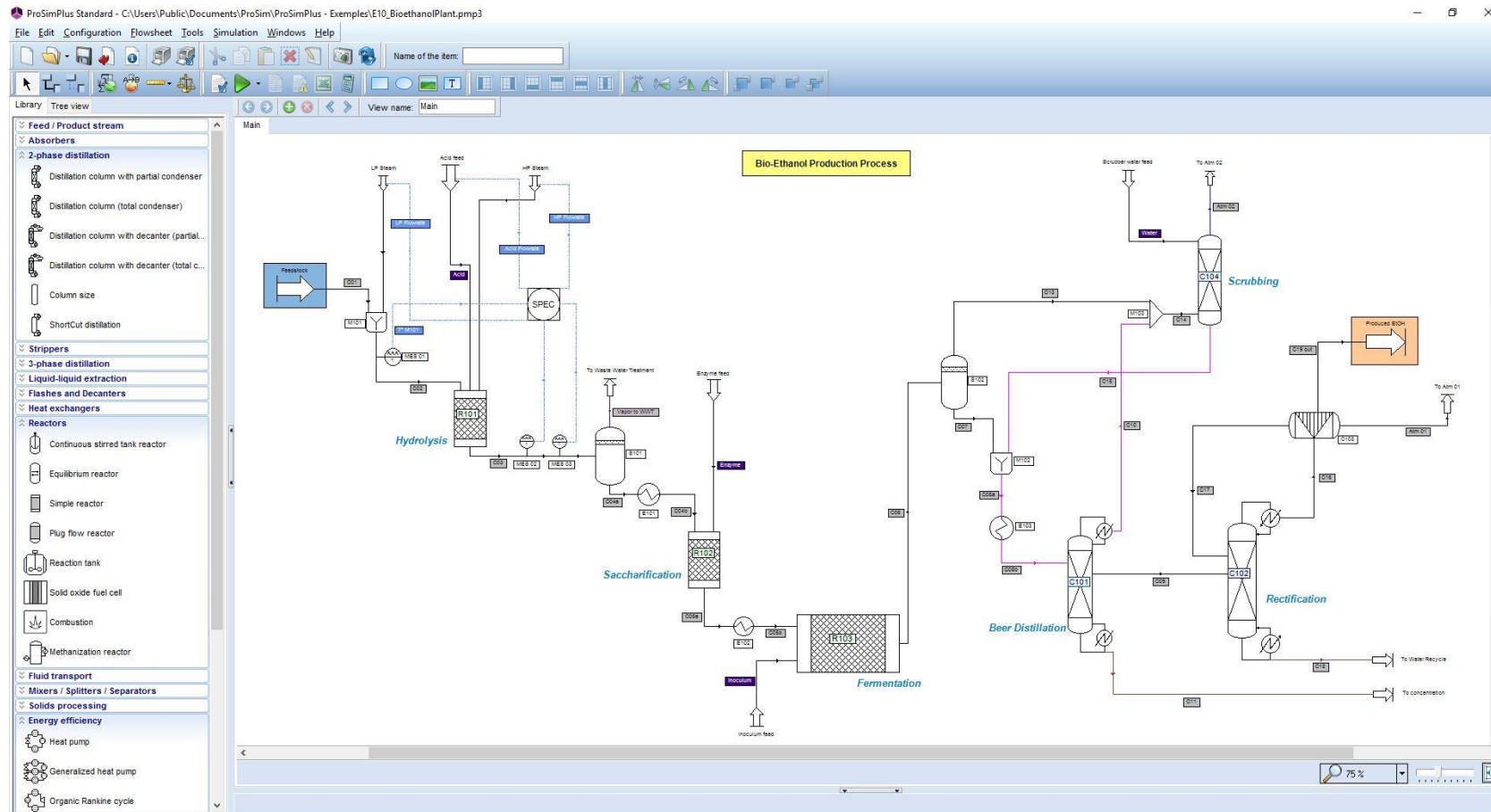
Economics		Energy		EDR Exchanger Feasibility		
Capital Cost	Utility Cost	Available Energy Savings		Unknown	OK	At Risk
USD	USD/Year	MW	% of Actual	2	0	0

UNISIM

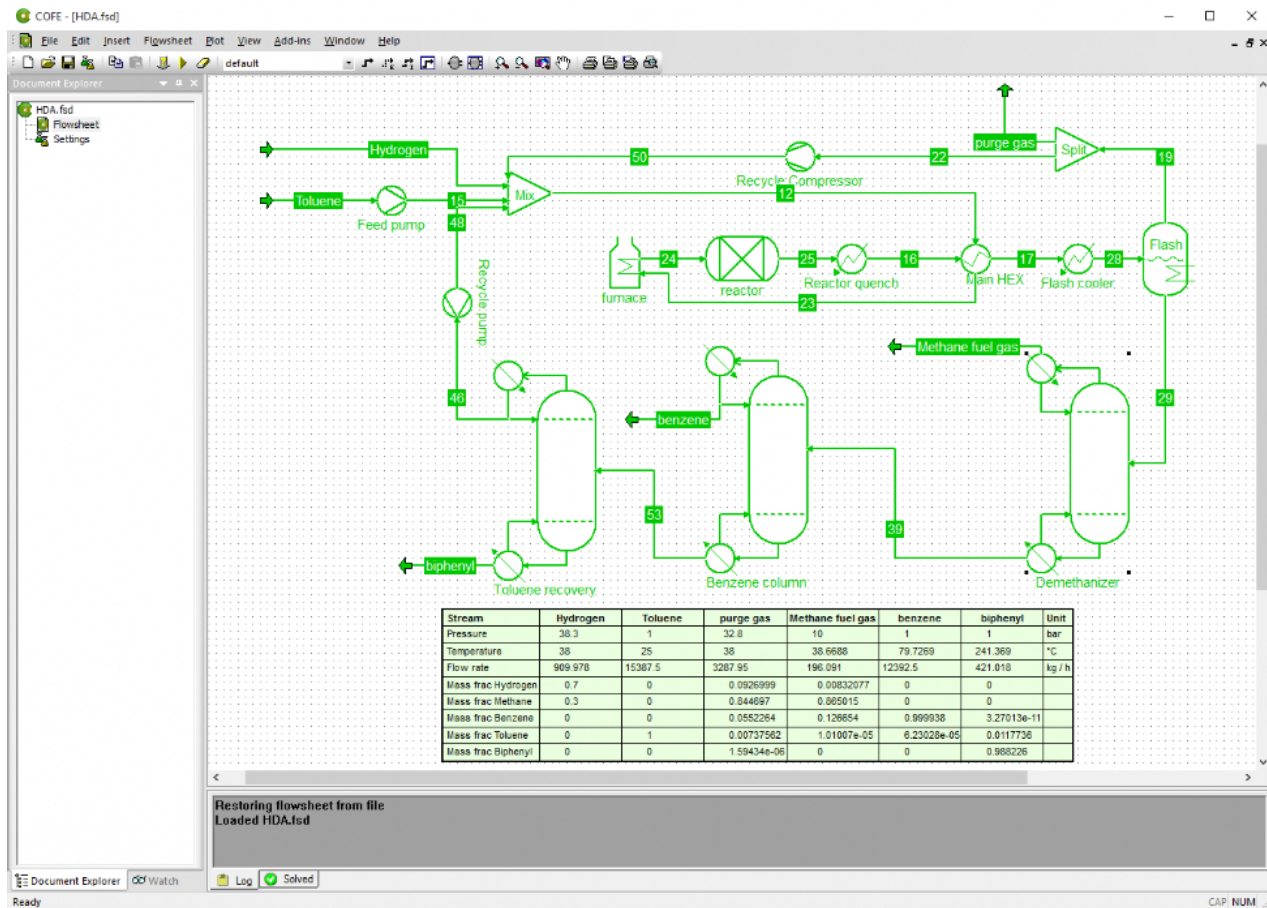
Honeywell



ProSimPlus



COCO



DWSIM

DWSIM - [Extractive Distillation (C:\Program Files\DWSIM5\samples\Extractive Distillation.dwxm)]

File Edit Insert Tools Utilities Optimization Scripts Results Plugins Windows View Help

Solve Flowsheet (F5) Abort Solver (Pause/Break)

Methanol Column (1 atm) (Distillation Column)

Material Streams Spreadsheet Flowsheet

Search

General Info

Object: Methanol Column (1 atm)

Status: Calculated (01/01/0001 00:00:00)

Linked to:

Column Specs

General Condenser Reboiler

Absorber Operating Mode:

Number of Stages: 40

Solver: Wang-Henke (Bubble Point)

Solving Scheme: Direct Rigorous

Maximum Number of Iterations: 1000

Convergence Tolerance: 0.002

Maximum Temperature Change: 10.0 K

Property Package: PP_1

Flash Algorithm: Default

Column Configuration

Connections Stages Initial Estimates BP Solver

File

Estimates

Stage	Temperatu (K)	Vapor Flow (mol/s)	Liquid Flow (mol/s)	
0	327,84061	0,0005	83,65429	
1	Estágio_1	328,08249	84,15289	76,56626
2	Estágio_2	328,55104	77,06486	68,17435
3	Estágio_3	329,45256	68,67295	59,25208
4	Estágio_4	331,00118	59,75068	51,49619
5	Estágio_5	333,0238	51,99479	46,3247

Streams Pressure Changers Separators/Tanks Mixers/Splitters Exchangers Reactors Columns Solids CAPE-OPEN User Models Logical Ops Other

Material Stream Energy Stream

Information

Date	Type	Message	Info
12/06/2019 10:10:11	Tip	If some windows are missing, click on 'View' > 'Restore Layout'.	+ Info
12/06/2019 10:10:11	Tip	To view detailed results of the calculations in real time, enable console redirection and select a debug mode. You must restart DWSIM for the changes to take effect.	+ Info
12/06/2019 10:10:11	Tip	Use the quick connection tool on the toolbar to quickly connect objects by pressing the CTRL key and dragging the cursor from the first to the second object.	+ Info
12/06/2019 10:10:11	Tip	Press F5 on any area inside the flowsheet to start a full calculation.	+ Info
12/06/2019 10:10:11	Tip	Hold SHIFT during DWSIM initialization to reset the settings to their default values.	+ Info
12/06/2019 10:10:10	Message	File C:\Program Files\DWSIM5\samples\Extractive Distillation.dwxm loaded successfully.	+ Info

This is an example of Pressure Swing Azeotropic Distillation.
 Test case from COCO Simulator: http://www.cocosimulator.org/down.php?dl=CScasebook_MA.fsd (original author: Harry Kooijman - www.chemsep.org)
 Methanol and acetone form a minimum temperature azeotrope but the composition of this azeotrope is sensitive to the pressure.
 We can make use of this to separate the two components into pure products by operating two columns at different pressures.
 This simulation uses 'Methanol' and 'Acetone' components from the ChemSep database. NRTL interaction parameters were taken from the ChemSep IPD file.
 More information on how to load a ChemSep database in DWSIM can be found at http://apps.sourceforge.net/mediawiki/dwsim/index.php?title=Loading_a_Cher

DWSIM - [Extractiv...]

10:10
12/06/2019

Margen de error

Margen de error de simuladores

Variable	Margen típico de error
Temperatura	1-2 %
Presión	1-2 %
Flujo másico o volumétrico	1-5 %
Composición de fases	2-5 %
Equilibrio L-V complejo	5-10 % (o más)

Errores de medición

Variable	Error típico absoluto	Error típico relativo
Presión	0.1 a 0.5 bar	0.5 % a 1.5 %
Temperatura	0.5 °C a 2 °C	0.2 % a 1 %
Caudal	—	1 % a 5 %
Composición	0.5 % a 2 % absoluto	1 % a 5 %

Factores que afectan al margen de error

- Modelo termodinámico elegido:
 - Ej: NRTL, Peng-Robinson, UNIFAC, SRK, etc.
 - Un modelo mal elegido puede introducir errores del orden del 10–20 % en equilibrio líquido-vapor o propiedades físicas.
- Calidad de los datos del sistema:
 - Si el sistema tiene componentes bien caracterizados (por ejemplo, agua, metano, etanol), los errores son bajos.
 - Para mezclas complejas (como nafta, biodiesel, aceites), los errores pueden ser mayores.

Factores que afectan al margen de error

- Cierre de balances:
 - Si el proceso tiene recirculaciones o muchos equipos acoplados, el error acumulado puede aumentar si no se ajustan adecuadamente los parámetros de convergencia.
- Condiciones operativas extremas:
 - A presiones muy altas, temperaturas criogénicas o mezclas reactivas, el margen de error puede aumentar significativamente (10 % o más).
- Aproximaciones en los modelos de transferencia de calor y masa:
 - El modelado simplificado de intercambiadores, reactores o torres de destilación puede agregar errores adicionales.

Criterio

- El error tolerable depende del objetivo de la simulación.
- Las limitaciones impuestas en la práctica reducen la utilidad de una solución exacta.
- Es un error de novatos dedicar recursos a reducir el error cuando ya se tiene un error tolerable para el objetivo de la simulación.
- En la práctica, muchas veces solo importa el orden de magnitud.

Mapa curricular de físico-química

1. Flash isotérmico
2. Punto de burbuja
3. Punto de rocío
4. Síntesis de procesos
5. Simuladores comerciales
6. Margen de error